

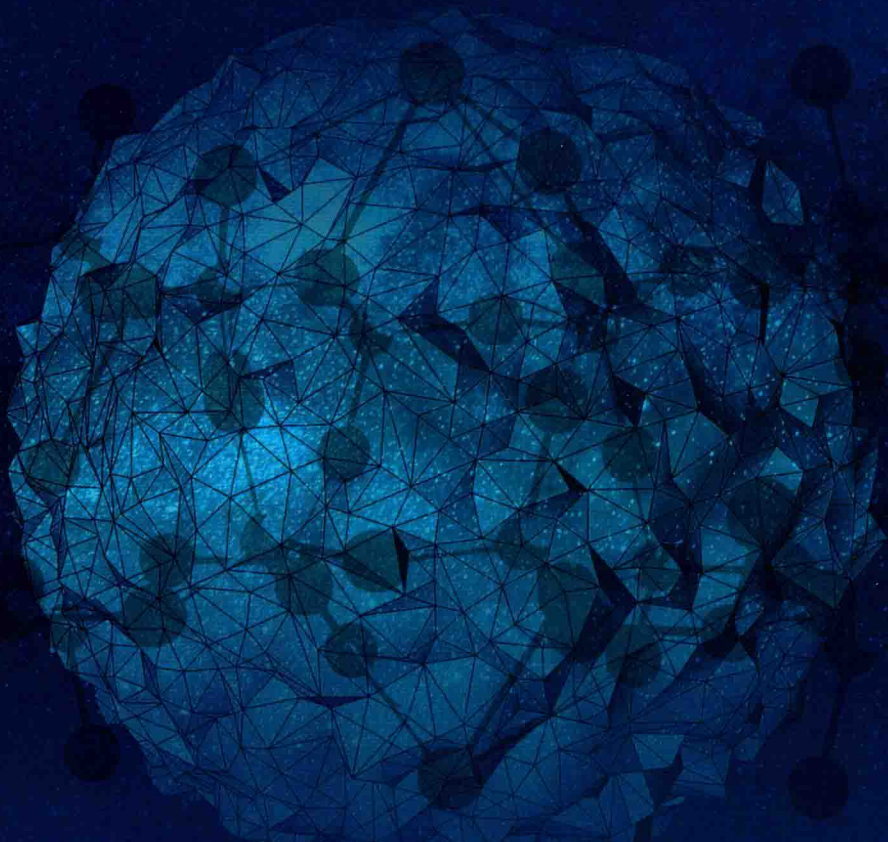
普通高等教育“十三五”规划教材

大学化学

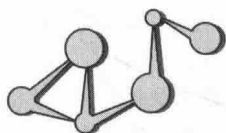
DAXUE HUAXUE

第二版

卢学实 王桂英 王吉清 主编



化学工业出版社



普通高等教育“十三五”规划教材

大学化学

DAXUE HUAXUE

第二版

卢学实 王桂英 王吉清 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

《大学化学》是普通高等理工科学校非化学化工类专业化学基础课教材。全书共分为八章，主要内容包括物质结构基础、化学反应的基本原理、溶液、电化学原理及应用、化学与材料、化学与能源、可持续发展与绿色化学、大学化学选做实验。前七章章末附有本章要点和习题。本书特点是以现代化学的基本原理和知识为基础，融合了传统化学学科的多个分支，并渗透了与化学密切相关的材料、能源、环境等学科的交叉内容。其知识体系系统完整、语言精练、概念准确、内容新、范围广，可以满足非化学化工类专业学生对化学知识的需求。

本书可作为材料、能源、环境、冶金、海洋、地质、包装等非化学专业本科生教材，也可供相关专业师生和科研工作者参考。读者可根据自身专业的特点，选学相应的章节。

图书在版编目 (CIP) 数据

大学化学/卢学实, 王桂英, 王吉清主编. —2 版.

—北京: 化学工业出版社, 2019. 9

ISBN 978-7-122-34779-4

I. ①大… II. ①卢…②王…③王… III. ①化学-
高等学校-教材 IV. ①O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 133638 号

责任编辑: 旷英姿 林 媛

装帧设计: 王晓宇

责任校对: 王鹏飞

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 三河市延风印装有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 19 $\frac{3}{4}$ 彩插 1 字数 478 千字 2019 年 10 月北京第 2 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888

售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 49.00 元

版权所有 违者必究

《大学化学》 编写人员

主 编 卢学实 (湖南工业大学)

王桂英 (湖南工业大学)

王吉清 (湖南工业大学)

副主编 贺全国 (湖南理工大学)

邓 靖 (湖南工业大学)

参 编 (以姓氏笔画为序)

王湘英 (湖南工业大学)

卢珏名 (湖南工业大学)

华 杰 (湖南理工学院)

刘有势 (湖南工业大学)

孙开太 (湖南工业大学)

李 青 (湖南工业大学)

李福枝 (湖南工业大学)

肖细梅 (湖南工业大学)

何 英 (湖南工业大学)

季 东 (兰州理工大学)

周晓媛 (湖南工业大学)

郑淑琴 (湖南理工学院)

陶 炳 (湖南工业大学)

傅 欣 (湖南工业大学)

戴玉春 (湖南工业大学)



前言

化学是一门既古老又年轻的科学，是研究物质的组成、结构、性质及其变化规律的科学。与工业生产、人民生活等都有非常密切的关系。

化学又是一门应用性极强的学科，它与数学、物理等学科共同成为自然科学迅猛发展的基础。化学的核心知识已经应用于自然科学的各个区域，化学是创造自然，改造自然的强大力量的重要支柱。目前，化学家们运用化学的观点来观察和思考社会问题，用化学的知识来分析和解决社会问题，例如能源问题、粮食问题、环境问题、健康问题、资源与可持续发展等问题。

化学与物理一起属于自然科学的基础学科，已经与各相邻学科交叉与渗透，产生了生物化学、农业化学、环境化学、能源化学、地球化学、材料化学、计算化学、医药化学等。

化学在保证人类的生存并不断提高人类的生活质量方面起着重要作用，例如：利用化学生产化肥和农药，以增加粮食产量；利用化学合成药物，以抑制细菌和病毒，保障人体健康；利用化学开发新能源、新材料，以改善人类的生存条件；利用化学综合应用自然资源和保护环境以使人类生活得更加美好。

总之，化学与人类的衣、食、住、行以及能源、信息、材料、国防、环境保护、医药卫生、资源利用等方面都有密切的联系。

大学化学是整个化学学科的导论，它扼要地阐述化学的基本理论、基本知识，并与关系国民经济发展的各种关键科学技术相联系。同时也是非化学、化工类专业在大学里必修的一门重要基础课程。使学生掌握现代化学的基本知识和理论，了解化学在社会发展和科技进步中的作用，了解化学在其发展过程中与其他学科相互渗透的特色，培养学生用现代化学的观点去观察和分析可能遇到的化学问题，为今后继续学习和工作打下必要的化学基础。

本次教材修订在第一版基础上进行，增加了选做实验。分为8章，分别为物质结构基础、化学反应的基本原理、溶液、电化学原理及应用、化学与材料、化学与能源、可持续发展与绿色化学、大学化学选做实验。

本教材具有以下特点：

1. 准确表达基本概念、基本原理，以及涉及的有关专业名词术语。
2. 教材内容覆盖面大、实用性强，注重新概念、新内容的引入。
3. 贴近社会、生活实际，反映现代科技新成就，激发学生学习化学的兴趣和求知欲望。

参加编写工作的有：卢学实（第1章，第5章5.6、5.7，第7章7.1、7.6）；王桂英（第2章2.1~2.4，第4章4.1~4.3）；王湘英（第2章2.5，第8章实验三）；何英（第3章）；卢珏名（第4章4.4，第8章实验一、实验二）；王吉清、李福枝（第5章5.1~5.5）；王吉清、贺全国、邓靖、郑淑琴、季东、华杰（第6章）；肖细梅（第7章7.2~7.5）；周晓媛（第8章实验四~实验六）；刘有势（第8章实验七，附录）；陶炳（第8章实验八）；傅欣（第8章实验九）；李青（第8章实验十、实验十三）；孙开太（第8章实验十一）；戴玉春（第8章实验十二）。本教材是在全体编者多年教学实践的基础上完善并充实的，在编写过程中得到各同行与化学工业出版社的关注与支持，在此表示感谢。对本书中引用的文献资料的作者致以衷心的感谢！

鉴于大学化学内容极为广泛，因此在内容取舍与文字编排中的疏漏、不妥之处在所难免，恳请专家与读者批评指正。

编者

2019年5月



第一版前言

化学是一门既古老又年轻的科学，是研究物质的组成、结构、性质以及变化规律的科学。化学与工业生产和国防现代化、人民生活和人类社会等都有非常密切的关系。

化学又是一门应用性极强的学科，其核心知识已经应用于自然科学的各个领域，是创造自然、改造自然的强大力量的重要支柱。目前，化学家们运用化学的观点来观察和思考社会问题，用化学的知识来分析和解决社会问题，例如能源问题、粮食问题、环境问题、健康问题、资源与可持续发展等问题。

化学属于自然科学的基础学科，与各相邻学科交叉与渗透，产生了生物化学、农业化学、环境化学、能源化学、地球化学、材料化学、计算化学、医药化学等。

化学在保证人类的生存并不断提高人类的生活质量方面起着重要作用。如利用化学生产化肥和农药，以增加粮食产量；利用化学合成药物，以抑制细菌和病毒，保障人体健康；利用化学开发新能源、新材料，以改善人类的生存条件；利用化学综合应用自然资源和保护环境，以使人类生活得更加美好。

总之，化学与人类的衣、食、住、行以及能源、信息、材料、国防、环境保护、医药卫生、资源利用等方面都有密切的联系。

大学化学是整个化学学科的导论，它扼要地阐述化学的基本理论、基本知识，并与关系国民经济发展的各种关键科学技术相联系。同时也是非化学、化工类专业在大学里必修的一门重要基础课程。该课程使学生掌握现代化学的基本知识和理论，了解化学在社会发展和科技进步中的作用，了解化学在其发展过程中与其他学科相互渗透的特色，培养学生用现代化学的观点去观察和分析可能遇到的化学问题，为今后继续学习和工作打下必要的化学基础。

本教材分为七部分，分别为物质结构基础、化学反应的基本原理、溶液、电化学原理及应用、化学与材料、化学与能源、化学与环境保护。

本教材在编写中力求具有以下特点。

1. 准确表达基本概念、基本原理以及涉及的各有关专业名词术语。
2. 教材内容覆盖面大、实用性强，注重新概念、新内容的引入。
3. 贴近社会、生活实际，反映现代科技新成就，激发学生学习化学的兴趣和求知欲望。

本书编写分工如下：卢学实编写前言及1，王桂英编写2、4，何英编写3，李福枝编写5，郑淑琴、季东、华杰编写6，肖细梅编写7及附录。本教材是在全体编者多年教学实践

的基础上完善充实后编写完成的，在编写过程中得到各同行与化学工业出版社的关注与支持，在此表示感谢。对本书中引用文献资料的作者致以衷心的感谢！

本书可作为材料、能源、环境、冶金、海洋、地质、包装等非化学专业本科生教材，也可供相关专业师生和科研工作者参考。读者可根据自身专业的特点，选学相应的章节。

鉴于大学化学内容极为广泛，因此在内容取舍与文字编排中的疏漏、不妥之处在所难免，恳请专家与读者批评指正。

编者

2012年6月

1 物质结构基础 / 1

- 1.1 原子结构 / 1
 - 1.1.1 氢原子结构 / 1
 - 1.1.2 多电子原子结构 / 6
 - 1.1.3 元素周期律 / 9
- 1.2 化学键与分子结构 / 12
 - 1.2.1 共价键的价键理论 / 12
 - 1.2.2 配合物的价键理论 / 21
 - 1.2.3 价层电子对互斥理论 / 24
 - 1.2.4 分子轨道理论 / 28
 - 1.2.5 离子键 / 32
 - 1.2.6 金属键 / 33
- 1.3 分子间力与氢键 / 34
 - 1.3.1 分子的电偶极矩和极化率 / 34
 - 1.3.2 分子间力 / 36
 - 1.3.3 氢键 / 38
- 1.4 晶体结构和缺陷 / 41
 - 1.4.1 晶体结构 / 41
 - 1.4.2 晶体缺陷 / 49

本章要点 / 51

习题 / 52

2 化学反应的基本原理 / 57

- 2.1 基本概念 / 57
 - 2.1.1 系统与环境 / 57
 - 2.1.2 聚集状态与相 / 58
 - 2.1.3 系统的状态与状态函数 / 59
 - 2.1.4 过程与途径 / 59
 - 2.1.5 热和功 / 60
 - 2.1.6 热力学能 / 61
 - 2.1.7 热力学第一定律 / 61
- 2.2 热化学 / 62

- 2.2.1 化学反应的热效应 / 62
- 2.2.2 化学反应进度 / 65
- 2.2.3 热化学方程式 / 66
- 2.2.4 盖斯定律 / 67
- 2.2.5 化学反应热的计算 / 67
- 2.3 化学反应的方向 / 71
 - 2.3.1 化学反应的自发过程 / 71
 - 2.3.2 影响化学反应方向的因素 / 71
 - 2.3.3 化学反应的标准摩尔吉布斯自由能变的计算和反应方向的判断 / 74
 - 2.3.4 利用反应的 $\Delta_r H_m^\ominus$ 和 $\Delta_r S_m^\ominus$ 估算反应自发进行的温度 / 76
- 2.4 化学反应的限度——化学平衡 / 77
 - 2.4.1 可逆反应与化学平衡 / 77
 - 2.4.2 平衡常数 / 78
 - 2.4.3 标准平衡常数与标准摩尔吉布斯自由能变 / 81
 - 2.4.4 化学平衡的移动 / 84
- 2.5 化学反应速率 / 86
 - 2.5.1 化学反应速率及其表示方法 / 86
 - 2.5.2 化学反应速率理论简介 / 87
 - 2.5.3 影响化学反应速率的因素 / 89

本章要点 / 95

习题 / 97

3 溶液 / 104

- 3.1 稀溶液的通性 / 104
 - 3.1.1 溶液浓度的表示方法 / 104
 - 3.1.2 稀溶液的蒸气压下降及拉乌尔定律 / 105
 - 3.1.3 稀溶液的沸点上升和凝固点下降 / 106
 - 3.1.4 溶液的渗透压 / 108
- 3.2 溶液中单相离子平衡 / 109
 - 3.2.1 弱电解质的解离平衡 / 109
 - 3.2.2 同离子效应和缓冲溶液 / 112
 - 3.2.3 配位平衡 / 114
- 3.3 酸碱理论 / 119
 - 3.3.1 酸碱质子理论 / 119
 - 3.3.2 酸碱反应 / 121
- 3.4 溶液中多相离子平衡 / 122
 - 3.4.1 难溶电解质的溶度积 / 122
 - 3.4.2 溶度积和溶解度 / 123
 - 3.4.3 溶度积规则及其应用 / 123
 - 3.4.4 多相离子平衡移动 / 124
- 3.5 胶体 / 127
 - 3.5.1 胶体的特性 / 127

- 3.5.2 胶体的结构 / 128
- 3.5.3 溶胶的稳定性与聚沉 / 129
- 3.5.4 胶体的保护 / 130
- 3.6 表面活性剂 / 130
 - 3.6.1 表面张力和表面活性剂 / 130
 - 3.6.2 表面活性剂的种类 / 131
 - 3.6.3 表面活性剂的作用和应用 / 131

本章要点 / 132

习题 / 134

4 电化学原理及应用 / 137

- 4.1 氧化还原反应 / 137
 - 4.1.1 氧化还原与氧化数 / 137
 - 4.1.2 氧化还原反应方程式的配平 / 139
 - 4.1.3 常见的氧化剂和还原剂 / 141
- 4.2 电极电势 / 142
 - 4.2.1 原电池与氧化还原反应 / 142
 - 4.2.2 电极电势 / 144
 - 4.2.3 标准电极电势 / 145
 - 4.2.4 能斯特方程 / 147
 - 4.2.5 电池电动势与反应吉布斯自由能变的关系 / 149
 - 4.2.6 氧化还原反应中的化学平衡 / 149
- 4.3 电极电势的应用 / 149
 - 4.3.1 计算原电池的电动势及电极的电极电势 / 150
 - 4.3.2 比较氧化剂和还原剂的相对强弱 / 151
 - 4.3.3 判断氧化还原反应进行的方向 / 151
 - 4.3.4 判断氧化还原反应进行的程度 / 152
 - 4.3.5 元素电势图 / 153
- 4.4 应用电化学简介 / 155
 - 4.4.1 化学电源 / 155
 - 4.4.2 电解 / 161
 - 4.4.3 金属的腐蚀与防护 / 162
 - 4.4.4 电化学中的环境保护 / 169

本章要点 / 171

习题 / 172

5 化学与材料 / 176

- 5.1 概述 / 176
 - 5.1.1 化学与材料的关系 / 177
 - 5.1.2 材料的定义与分类 / 177
 - 5.1.3 材料的地位与作用 / 178
- 5.2 金属材料 / 178
 - 5.2.1 钢铁 / 178

- 5.2.2 铜和铜合金 / 179
- 5.2.3 铝和铝合金 / 179
- 5.2.4 镁和镁合金 / 180
- 5.2.5 钛和钛合金 / 180
- 5.3 无机非金属材料 / 180
 - 5.3.1 陶瓷 / 180
 - 5.3.2 非晶态材料与玻璃 / 182
 - 5.3.3 水泥与胶凝材料 / 182
 - 5.3.4 混凝土 / 183
 - 5.3.5 耐火材料 / 184
- 5.4 高分子材料 / 184
 - 5.4.1 塑料 / 185
 - 5.4.2 橡胶 / 187
 - 5.4.3 涂料与胶黏剂 / 188
 - 5.4.4 纤维 / 189
 - 5.4.5 功能高分子材料 / 191
- 5.5 复合材料 / 192
 - 5.5.1 金属基复合材料 / 192
 - 5.5.2 聚合物基复合材料 / 193
 - 5.5.3 陶瓷基复合材料 / 194
- 5.6 超材料 / 196
 - 5.6.1 几类超材料 / 197
 - 5.6.2 超材料的应用与展望 / 198
- 5.7 碳纤维材料 / 201
 - 5.7.1 碳纤维概述 / 201
 - 5.7.2 国内外研究发展状况 / 203
 - 5.7.3 碳纤维材料应用实例：碳纳米管 / 204
- 本章要点 / 205
- 习题 / 207

6 化学与能源 / 208

- 6.1 能源概述 / 208
 - 6.1.1 能源的概念与分类 / 208
 - 6.1.2 能量的转化 / 209
 - 6.1.3 能源利用的发展史 / 210
- 6.2 常规能源 / 211
 - 6.2.1 燃料的分类与组成 / 211
 - 6.2.2 燃料的热值 / 212
 - 6.2.3 煤、石油、天然气、水能 / 213
- 6.3 新能源 / 219
 - 6.3.1 核能 / 219
 - 6.3.2 氢能 / 223

- 6.3.3 太阳能 / 225
- 6.3.4 生物质能 / 226
- 6.3.5 可燃冰 / 226

本章要点 / 227

习题 / 227

7 可持续发展与绿色化学 / 230

- 7.1 可持续发展的内涵 / 230
 - 7.1.1 关于可持续发展的诸多解释 / 230
 - 7.1.2 可持续发展的含义 / 232
- 7.2 人类与环境 / 233
 - 7.2.1 环境 / 233
 - 7.2.2 环境的形成和发展 / 234
 - 7.2.3 人体中的化学 / 234
 - 7.2.4 人类与环境的关系 / 238
- 7.3 环境污染 / 239
 - 7.3.1 大气污染 / 239
 - 7.3.2 水污染 / 244
 - 7.3.3 土壤污染及荒漠化、沙化 / 246
- 7.4 环境污染的防治 / 248
 - 7.4.1 大气污染的防治 / 248
 - 7.4.2 水污染的防治 / 249
 - 7.4.3 土壤污染的防治 / 252
- 7.5 废物的综合利用 / 253
 - 7.5.1 废气的综合利用 / 253
 - 7.5.2 废水的综合利用 / 254
 - 7.5.3 废渣的综合利用 / 254
- 7.6 绿色化学 / 255
 - 7.6.1 绿色化学的基本概念 / 255
 - 7.6.2 绿色化学实例 / 256

本章要点 / 257

习题 / 258

8 大学化学选做实验 / 260

- 实验一 电化学实验 / 260
- 实验二 氨基的测定 / 265
- 实验三 醋酸总酸度的测定 / 267
- 实验四 水的总硬度测定 / 269
- 实验五 pH值的测定 / 271
- 实验六 醋酸解离常数的测定 / 273
- 实验七 分光光度法测定钢中的锰 / 275
- 实验八 离子选择性电极法测定水中氟含量 / 277
- 实验九 硫酸铜的提纯 / 280

实验十 淀粉胶黏剂的制备 / 282

实验十一 比色法测定水果(或蔬菜)中维生素 C 的含量 / 283

实验十二 从茶叶中提取咖啡碱 / 285

实验十三 计算机联用测定无机盐溶解热 / 287

附录 / 290

附录 1 常用符号表 / 290

附录 2 一些单质和化合物的 $\Delta_f H_m^\ominus$ 、 $\Delta_f G_m^\ominus$ 和 S_m^\ominus (298.15K) / 290

附录 3 一些弱电解质的解离常数 (298.15K) / 294

附录 4 一些物质的溶度积 (298.15K) / 295

附录 5 标准电极电势 (298.15K) / 296

参考文献 / 298

元素周期表/300

物质世界五光十色、千变万化，归根结底，由物质的组成、结构决定。研究物质世界就是研究物质的组成、结构、性质及其变化规律。本章将讨论原子结构、化学键和晶体结构方面的基本理论和基础知识，这对于掌握物质的性质及其变化规律具有十分重要的意义。

1.1 原子结构

原子由原子核和电子组成，原子核由质子和中子组成。电子的质量为 $9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ，而质子和中子的质量分别是电子质量的 1836 倍和 1839 倍。因此，在原子中，电子的质量可以忽略不计。原子很小，其直径约为 10^{-10} m ，原子核的直径为 $10^{-16} \sim 10^{-14} \text{ m}$ ，电子的直径约为 10^{-15} m 。由此，我们得到两个结论：①电子在原子中的活动空间是巨大的；②原子核的密度是巨大的，约为 10^{14} g/cm^3 。

1.1.1 氢原子结构

为了解释 1885 年巴尔麦 (Balmer) 在可见光范围内发现的氢原子的线状光谱，1913 年玻尔 (N. Bohr) 吸收了普朗克 (Planck) 在 1900 年提出的量子论和爱因斯坦 (Einstein) 在 1905 年提出的光子论，大胆地提出了新的原子结构理论——玻尔理论，成功地解释了氢原子光谱。但是玻尔理论不能解释氢原子光谱的精细结构和多电子原子光谱，这是因为玻尔理论并没有完全摆脱经典力学的束缚，认为电子是沿着固定的原子轨道绕核运动，这不符合电子的运动规律。

受光的波粒二象性的启发，1924 年德布罗意 (de Broglie) 提出电子等微观粒子也具有波粒二象性，这一假设的正确性很快被电子衍射实验所证实。至此，必须建立一个新的观念：电子等微观粒子的运动不能用经典力学的理论来描述。

为了描述电子等微观粒子的运动规律，薛定谔 (E. Schrodinger)、海森堡 (Heisenberg)、保罗·狄拉克 (Paul Dirac) 等创立了量子力学，为物质微观结构的研究奠定了理论基础。1926 年奥地利物理学家薛定谔 (E. Schrodinger) 根据德布罗意关于物质波

的观点, 引用电磁波的波动方程, 提出了描述微观粒子运动规律的波动方程——薛定谔方程, 这是一个二阶偏微分方程:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2} \right) (E - V) \psi = 0$$

对于氢原子系统, 式中 m 为电子的质量; E 相当于氢原子的总能量; V 为系统的势能; ψ 为电子三维空间坐标 x 、 y 、 z 的函数, 称为波函数 (习惯上称原子轨道), 即描述原子核外电子运动状态的函数; h 为普朗克常数。解薛定谔方程, 就可求出描述微观粒子 (如电子) 运动状态的函数式——波函数 ψ 以及与此状态相应的能量 E 。薛定谔方程体现了微观粒子的粒子性 (m 和 E) 和波动性 (ψ) 的特性。

1.1.1.1 描述电子运动状态的四个量子数

对氢原子薛定谔方程精确求解的过程中很自然地引入了三个参数 n 、 l 、 m 。这三个参数的取值必须是量子化的, 因而统称为量子数。为使所得到的解有合理的物理意义, 必须对它们的取值作一定的限制。现将它们的取值和在描述电子运动状态时的物理意义分述如下。

三个量子数的取值规定如下。

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, 4, \dots, \infty && \text{正整数} \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1) && \text{共可取 } n \text{ 个值} \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l && \text{共可取 } 2l+1 \text{ 个值} \end{aligned}$$

可见, l 取值受 n 的数值限制, 当 $n=1$ 时, l 只能取 0; m 取值又受 l 的数值限制, 当 $l=0$ 时, m 只能取 0; 当 $l=1$ 时, m 可取 $-1, 0, +1$ 三个数值。因此, 三个量子数的组合必须符合一定的规律。原子轨道与 n 、 l 、 m 三个量子数的关系列于表 1-1 中。

表 1-1 氢原子轨道和三个量子数的关系

n	l	m	轨道名称	轨道数
1	0	0	1s	1
2	0	0	2s	1
2	1	-1, 0, +1	2p	3
3	0	0	3s	1
3	1	-1, 0, +1	3p	3
3	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5
4	0	0	4s	1
4	1	-1, 0, +1	4p	3
4	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5
4	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7

(1) 主量子数 (n)

主量子数 n 是确定电子能级的主要量子数, 对于氢原子电子能量 E 仅和主量子数 n 有关, 即:

$$E = -2.179 \times 10^{-18} \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

可见, n 越大, 电子能级越高。

主量子数 n 也表示原子轨道离核的远近。即通常所说的电子层的层数, 它是描述原子轨道能量高低的主要因素。 n 值越大, 表示电子离核平均距离越远。通常具有相同 n 的各原子轨道同属一个电子层。与 n 对应的电子层的符号如下:

主量子数 n 1 2 3 4 5 6 7 ...

电子层符号 K L M N O P Q ...

(2) 角量子数 (l)

角量子数 l 用于确定原子轨道 (或电子云) 的形状。 l 数值不同, 轨道形状也不同。例如, s 轨道, $l=0$, 其轨道形状为球形; p 轨道, $l=1$, 其轨道呈哑铃形; d 轨道, $l=2$, 其轨道呈花瓣形; f 轨道, $l=3$, 轨道形状较复杂。

角量子数 l 也表示电子所在的电子亚层, 具有相同角量子数的各个原子轨道同属一个电子亚层。与 l 对应的电子亚层的符号如下:

角量子数 l 0 1 2 3 4 ...

电子亚层符号 s p d f g ...

原子轨道形状 球形 哑铃形 花瓣形

对多电子原子来说, 角量子数 l 对其能量也将产生影响。此时电子能级由 n 、 l 两个量子数决定。

(3) 磁量子数 (m)

磁量子数 m 可以确定原子轨道或电子云在空间的取向。当 l 数值相同, m 数值不同时, 表示与 l 对应形状的原子轨道可以在空间取不同的伸展方向, 从而得到几个空间取向不同的原子轨道。如 $l=0$, $m=0$, 在空间只有一种取向, 只有一个 s 轨道; $l=1$, $m=0, \pm 1$, 在空间有三种取向, 表示 p 亚层有三个轨道: p_x, p_y, p_z ; $l=2$, $m=0, \pm 1, \pm 2$, 在空间有五种取向, 表示 d 亚层有五个轨道: $d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{z^2}, d_{x^2-y^2}$; $l=3$, $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$, 在空间有七种取向, 表示 f 亚层有 7 个轨道。

在没有外加磁场的情况下, 同一亚层的原子轨道 (如 p_x, p_y, p_z) 能量相等, 叫等价轨道。

(4) 自旋量子数 (m_s)

原子光谱实验证明, 三个量子数皆相同的电子仍表现出不同的性质, 为解释这一现象, 引出了第 4 个量子数, 称自旋量子数 m_s 。从量子力学的观点看, 电子自旋并非真像地球绕轴自旋一样, 它只是表示电子的两种不同状态。这两种状态有不同的“自旋”角动量, m_s 能取 $\pm \frac{1}{2}$ 两个数值。通常用“ $\uparrow \uparrow$ ”表示自旋平行状态的两个电子, 用“ $\uparrow \downarrow$ ”表示自旋非平行 (配对) 状态的两个电子。

根据四个量子数间的关系, 可以得出各电子层中可能存在的电子运动状态的数目, 见表 1-2 所列。

表 1-2 核外电子可能存在的状态数

电子层	K $n=1$	L $n=2$		M $n=3$			N $n=4$				n
原子轨道符号	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	...
轨道的空间取向数	1	1	3	1	3	5	1	3	5	7	...
电子容量	2	8		18			32				$2n^2$

1.1.1.2 氢原子波函数

波函数可用直角坐标表示为 $\psi_{n,l,m}(x, y, z)$, 也可用球坐标表示为 $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ 。用球坐标表示更方便。设原子核在坐标原点 O 上, P 点为核外电子的位置, 如图 1-1 所示, ρ 表示 P 点到坐标原点的距离 (电子离核的距离), θ 表示 z 轴与 r 的夹角, φ 表示 r 在 xOy 平